

## Capítulo 4

### Resultados da Simulação de Sistemas de Partículas Esferocilíndricas

#### 4.1 – Introdução

O método de simulação desenvolvido neste trabalho e apresentado no capítulo anterior, por tratar de sistemas granulares formados por partículas não-esféricas, abre espaço para um vasto campo de estudos. Neste capítulo, serão apresentados alguns resultados obtidos através de sua aplicação. Para isto, desenvolveu-se um conjunto de programas computacionais escritos na linguagem Fortran-90, aos quais competem as tarefas de gerar as configurações iniciais necessárias, executar as etapas do Método de Monte Carlo, calcular as propriedades de interesse nas configurações finais e gerar imagens tridimensionais para visualização das mesmas.










Resultados foram obtidos para sistemas monodispersos e para misturas binárias de partículas esferocilíndricas. No primeiro caso, foram computados a fração global de vazios, o número de coordenação e os perfis de fração local de vazios de leitos compactos formados por esferocilindros com diversos valores de razão de alongamento. No segundo caso, foi estudada a segregação espacial provocada pela diferença na forma geométrica das partículas constituintes de leitos submetidos a vibrações mecânicas.

#### 4.2 – Sistemas Monodispersos

Nesta seção, utiliza-se o Método de Monte Carlo para simular a formação de leitos de partículas esferocilíndricas. Pretende-se realizar um estudo sistemático para se tentar prever a influência da forma geométrica das partículas sobre certas propriedades estruturais de um leito. Para isto, consideram-se sistemas monodispersos formados por partículas com determinados valores de razão de alongamento ( $\varphi$ ). Em todos os casos, as partículas têm o mesmo volume ( $V$ ), equivalente ao de uma esfera com diâmetro

igual a  $1 \times 10^{-3} \text{ m}$ , ou seja, aproximadamente  $0,5236 \times 10^{-9} \text{ m}^3$ . Dados o volume e a razão de alongamento de um esferocilindro, calculam-se o seu diâmetro ( $\sigma$ ) e o seu comprimento ( $\ell$ ) através das Equações (3.2.1) e (3.3.9). Os parâmetros geométricos das partículas que constituem os sistemas estudados encontram-se na Tabela 4.2.1. Como se observa, as razões de alongamento escolhidas variam entre 0 (zero) e 3,5. A densidade das partículas ( $\rho$ ) também é a mesma em todos os casos, igual a  $1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ .

Tabela 4.2.1 – Parâmetros geométricos das partículas simuladas.

| Partícula   | Diâmetro<br>( $\sigma$ , $10^{-3} \text{ m}$ ) | Comprimento<br>( $\ell$ , $10^{-3} \text{ m}$ ) | Razão de<br>alongamento ( $\varphi$ ) |
|---|--|---|---------------------------------------|
|    | 1,000000                                       | 0,000000  | 0,000                                 |
|    | 0,944326                                       | 0,118041  | 0,125                                 |
|   | 0,899289                                       | 0,224822  | 0,250                                 |
|  | 0,829827                                       | 0,414913  | 0,500                                 |
|  | 0,777822                                       | 0,583367  | 0,750                                 |
|  | 0,736806                                       | 0,736806  | 1,000                                 |
|  | 0,675106                                       | 1,012660  | 1,500                                 |
|  | 0,594888                                       | 1,487221  | 2,500                                 |
|  | 0,542884                                       | 1,900092  | 3,500                                 |

É possível, a partir de configurações obtidas por simulação, calcular propriedades de leitos em fase volumar ou avaliar a influência que as paredes de um recipiente exercem sobre tais propriedades. Com este intuito, realizam-se, para sistemas com cada tipo de partícula da Tabela 4.2.1, simulações em caixas cilíndricas e simulações em caixas com condições de contorno periódicas nas laterais. Todas as caixas cilíndricas possuem  $12 \times 10^{-3} \text{ m}$  de diâmetro ( $D$ ) e contêm 2500 partículas ( $N_p$ ). As caixas com condições de contorno periódicas possuem  $10 \times 10^{-3} \text{ m}$  de largura ( $L$ , nas duas direções laterais) e contêm 2000 partículas ( $N_p$ ). Antes de se dar início a uma simulação, necessita-se de uma configuração inicial sem interpenetrações. Para gerá-la, o espaço no interior da caixa de simulação é mapeado em forma de um *lattice* com um

mínimo de  $N_p$  células cúbicas, cada uma com dimensão suficiente para comportar uma partícula em qualquer orientação. Então, localizam-se os vetores posição ( $\mathbf{r}$ ) nos centros de  $N_p$  células aleatoriamente escolhidas e sorteiam-se os vetores orientação ( $\mathbf{u}$ ) a partir da superfície de uma esfera de raio unitário (Allen e Tildesley, 1987, p. 349), levando-se em conta que nenhum par de vetores  $\mathbf{r}_i$  e  $\mathbf{u}_i$  pode causar interpenetração entre a respectiva partícula “i” e as paredes do recipiente. Em seguida, realizam-se  $10^4$  passos de Monte Carlo na ausência do campo gravitacional, de modo que se desfça a estrutura em *lattice*. É válido comentar que a altura da caixa não afeta o resultado de uma simulação, já que as partículas se compactam no fundo dela. No entanto, um valor muito elevado acarretaria na divisão do sistema em um número excessivo de células para a manutenção de listas de vizinhos. Portanto, o valor escolhido, em cada caso, deve ser o mínimo suficiente para se gerar a configuração inicial e para permitir a elevação das partículas, durante eventuais ciclos de vibração, sem que se causem interpenetrações com a parede do topo.

Outras condições estabelecidas para as simulações são independentes do tipo de caixa empregado. A temperatura granular ( $T$ ), em todos os casos, é fixada em zero. A densidade do fluido contido na caixa ( $\rho_f$ ) é igual a  $1 \text{ kg/m}^3$  e a aceleração da gravidade ( $g$ ) igual a  $9,8 \text{ m/s}^2$ . Com o intuito de obter compactações efetivas, cada simulação começa com a execução de 20 ciclos de vibração, empregando-se a metodologia exposta no capítulo anterior (Seção 3.6). Para cada sistema, realizam-se vibrações com amplitude ( $A_{\text{vib}}$ ) igual a  $2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  ou com amplitude igual a  $0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$ . Os demais parâmetros relacionados a vibrações são:  $N_{\text{min}} = 10^3$ ,  $N_{\text{med}} = 10$  e  $\delta_E = 10^{-5}$ . Por fim, após os ciclos de vibração, executam-se  $5 \times 10^4$  ciclos de Monte Carlo adicionais, visando-se promover uma compactação final do leito. Para cada partícula “i”, os parâmetros  $\Delta r_{\text{max},i}$  e  $\Delta \theta_{\text{max},i}$ , cujos valores iniciais são  $\sigma_i/40$  e  $\pi/180$  radianos, respectivamente, são ajustados a cada 50 ciclos de Monte Carlo, durante toda uma simulação.

Após a execução dos passos descritos, obtêm-se as posições e as orientações de todas as partículas de um leito compacto de esferocilindros. Isto permite o cálculo das

propriedades estruturais de interesse e a visualização dos sistemas por meio de imagens tridimensionais. A linguagem VRML 2.0, apresentada em detalhes por Ames *et al.* (1996), foi utilizada para a geração das imagens mostradas na Figura 4.2.1, que correspondem a resultados de simulações de leitos confinados em recipientes cilíndricos. Na Figura 4.2.1(a), tem-se um leito de esferas. Na Figura 4.2.1 (b), o leito é formado por partículas esferocilíndricas pouco alongadas, cuja razão de alongamento é igual a 0,5. Já no caso da Figura 4.2.1(c), as partículas possuem um grande alongamento, tendo razão igual a 3,5.

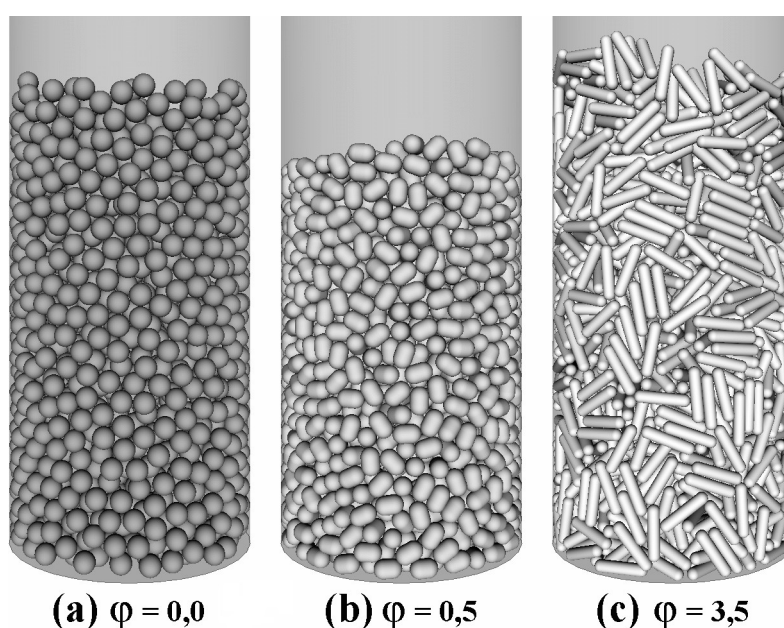


Figura 4.2.1 – Imagens tridimensionais de leitos monodispersos simulados.

Para se aumentar a confiabilidade dos resultados, efetuam-se 10 realizações para cada sistema, ou seja, para cada conjunto de parâmetros, executa-se o método de simulação a partir de 10 diferentes configurações iniciais, o que leva a configurações finais distintas. Então, para se obter resultados representativos das propriedades de um determinado sistema, calculam-se as médias dos valores de tais propriedades obtidos a partir das 10 correspondentes realizações. Como se consideram 9 diferentes tipos de partícula, 2 valores de amplitude de vibração e 2 tipos de caixa, chega-se a um total de 360 simulações realizadas.

#### 4.2.1 – Fração Global de Vazios

O primeiro passo após a obtenção dos leitos consiste no cálculo da fração global de vazios de cada um deles. Como foi referido no capítulo anterior, um parâmetro importante que afeta o resultado deste cálculo é a fração do leito que se utiliza para a amostragem, denominada por  $v_L$ . Se o valor deste parâmetro for muito baixo, tem-se uma amostra diminuta, o que faz com que o volume de uma única partícula seja suficiente para interferir consideravelmente na fração de vazios calculada. Como consequência, tem-se um resultado com baixa precisão. Por outro lado, se o valor de  $v_L$  for muito próximo de uma unidade, embutem-se no valor da fração de vazios os efeitos de fundo e de topo do leito, o que é indesejável. Busca-se, então, uma faixa intermediária de valores de  $v_L$  que proporcione resultados confiáveis.

Para ilustrar as circunstâncias discutidas acima, calcula-se a fração global de vazios para alguns sistemas simulados, variando-se a altura da região de amostragem de 10% a 100% da altura total do leito. Na Figura 4.2.2, vêem-se os resultados obtidos para leitos monodispersos de partículas com quatro diferentes razões de alongamento, tanto em caixas cilíndricas [Figura 4.2.2(a)] quanto em caixas com condições periódicas de contorno [Figura 4.2.2(b)]. Em todos os casos, observa-se uma oscilação acentuada na fração de vazios para valores baixos de  $v_L$  e um aumento sistemático no valor da propriedade para valores altos de  $v_L$ . Flutuações baixas são observadas apenas na região intermediária, como previsto.

Visto que a Figura 4.2.2 contém resultados referentes a razões de alongamento distribuídas por toda a faixa considerada, pode-se eleger o intervalo de  $v_L$  entre 0,4 e 0,7 como confiável para o cálculo da fração de vazios de todos os 360 leitos. Assim sendo, valores representativos de tal propriedade podem ser obtidos a partir da Equação (3.5.10), fixando-se em 0,4 e 0,7 os valores das variáveis  $v_1$  e  $v_2$ , respectivamente. As integrações necessárias são realizadas numericamente, através do Método de Simpson (Press *et al.*, 1992, p. 124) com 101 pontos de colocação regularmente espaçados.

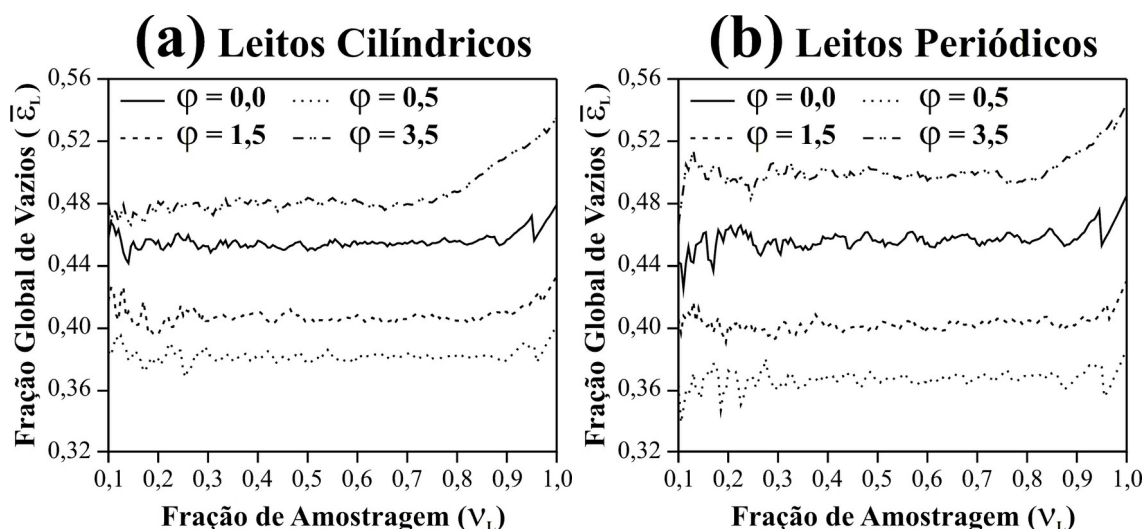


Figura 4.2.2 – Fração global de vazios em função da fração de amostragem do leito.

Estima-se a fração de vazios de um determinado sistema através da média aritmética dos valores calculados nas 10 diferentes simulações realizadas para o mesmo. Pode-se, ainda, inferir sobre o erro de tal estimativa através do desvio padrão da amostra. Os resultados obtidos para todos os sistemas simulados estão dispostos na Tabela 4.2.2. A obtenção de baixos valores de desvio padrão, em relação aos valores médios, demonstra que o método de cálculo apresenta boa precisão.

Tabela 4.2.2 – Frações globais de vazios calculadas para os sistemas simulados.

| $\varphi$ | Fração Global de Vazios                  |               |  |               |  |               |  |               |
|-----------|--|---------------|--|---------------|--|---------------|--|---------------|
|           | Leitos Cilíndricos                       |               |  |               | Leitos Periódicos                        |               |  |               |
|           | $A_{vib} = 0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               | $A_{vib} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               | $A_{vib} = 0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               | $A_{vib} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               |
|           | Média                                    | Desvio Padrão | Média                                    | Desvio Padrão | Média                                    | Desvio Padrão | Média                                    | Desvio Padrão |
| 0,000     | 0,4478                                   | 0,0015        | 0,4642                                   | 0,0024        | 0,4255                                   | 0,0016        | 0,4379                                   | 0,0020        |
| 0,125     | 0,4048                                   | 0,0019        | 0,4175                                   | 0,0027        | 0,3798                                   | 0,0020        | 0,3938                                   | 0,0021        |
| 0,250     | 0,3826                                   | 0,0012        | 0,3941                                   | 0,0021        | 0,3590                                   | 0,0022        | 0,3707                                   | 0,0025        |
| 0,500     | 0,3685                                   | 0,0021        | 0,3816                                   | 0,0023        | 0,3463                                   | 0,0016        | 0,3587                                   | 0,0018        |
| 0,750     | 0,3698                                   | 0,0019        | 0,3813                                   | 0,0020        | 0,3508                                   | 0,0012        | 0,3620                                   | 0,0019        |
| 1,000     | 0,3758                                   | 0,0020        | 0,3868                                   | 0,0016        | 0,3585                                   | 0,0021        | 0,3707                                   | 0,0016        |
| 1,500     | 0,3943                                   | 0,0015        | 0,4043                                   | 0,0014        | 0,3769                                   | 0,0016        | 0,3882                                   | 0,0014        |
| 2,500     | 0,4347                                   | 0,0017        | 0,4390                                   | 0,0020        | 0,4193                                   | 0,0014        | 0,4271                                   | 0,0025        |
| 3,500     | 0,4743                                   | 0,0022        | 0,4743                                   | 0,0020        | 0,4594                                   | 0,0015        | 0,4624                                   | 0,0022        |

Para análise dos resultados de fração global de vazios, traçam-se duas curvas a partir dos números da Tabela 4.2.2, as quais podem ser observadas na Figura 4.2.3. Uma delas se refere aos sistemas confinados em caixas cilíndricas, enquanto a outra aos sistemas com condições de contorno periódicas.

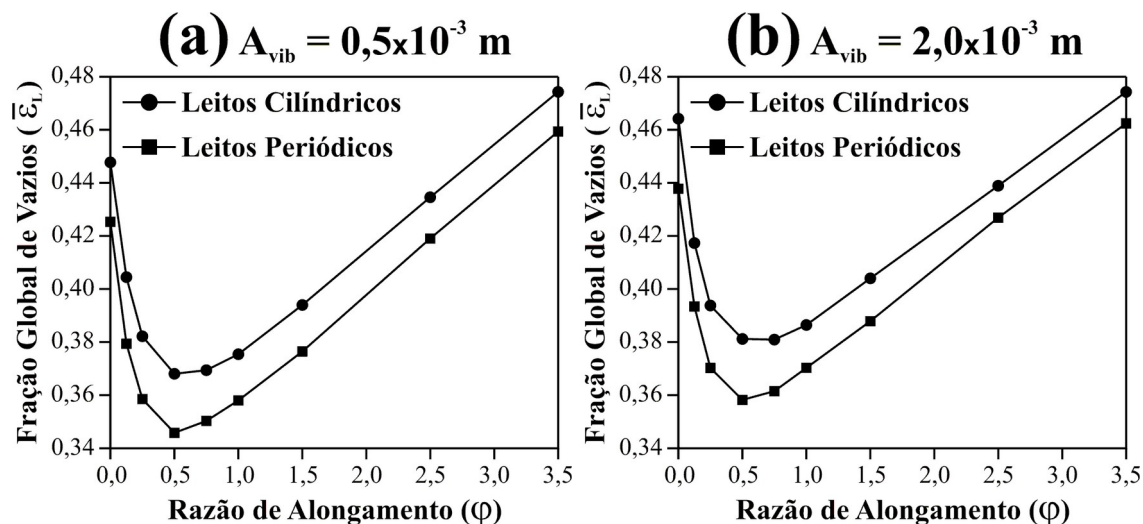


Figura 4.2.3 – Fração global de vazios média de leitos monodispersos de esferocilindros como função da razão de alongamento das partículas.

A primeira característica que se pode notar na Figura 4.2.3 é que as curvas de frações de vazios dos sistemas confinados por paredes cilíndricas estão sempre acima daquelas para sistemas sem paredes laterais. Isto mostra que a presença de paredes inibe o arranjo das partículas, impedindo que o sistema alcance uma alta compactação. Indutivamente, pode-se dizer a diferença entre as curvas seria menor se o valor do diâmetro da caixa cilíndrica ( $D$ ) fosse maior.

Comparando-se as curvas da Figura 4.2.3(a) com as suas correspondentes na Figura 4.2.3(b), observa-se que a redução na amplitude de vibração de  $2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$  para  $0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$  promove a formação de leitos mais compactos, principalmente na região de baixas razões de alongamento. De fato, para o caso de  $A_{vib} = 0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$ , ocorre um aumento contínuo na densidade do leito durante a etapa de vibração, o que não acontece para  $A_{vib} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$ . Isto pode ser notado através da Figura 4.2.4, que apresenta valores da altitude média das partículas (em relação à parede de fundo),

calculados ao final de cada ciclo de vibração (imediatamente antes da elevação das partículas). Quanto menor for esta distância, mais compacto será o leito. Portanto, conclui-se que as vibrações de menor amplitude promovem um progressivo rearranjo das partículas, permitindo que o sistema escape de mínimos locais de energia potencial. Por outro lado, com a amplitude mais alta, o que ocorre é uma sucessão de arranjos e desarranjos, o que impede uma compactação efetiva.

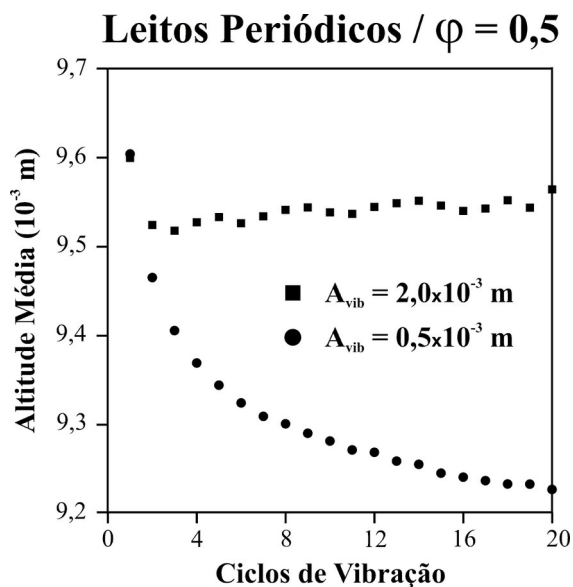


Figura 4.2.4 – Distância média das partículas à parede de fundo calculada ao final de cada ciclo de vibração (médias de 10 simulações).

Outra constatação interessante auxiliada pela Figura 4.2.3 é que todas as curvas apresentam pontos mínimos. Isto significa que há esferocilindros capazes de fornecer leitos mais compactos que aqueles produzidos por esferas. Independentemente da presença de paredes laterais, o ponto crítico ocorre para razões de alongamento em torno de 0,5. Após um certo valor desta razão, entre 2,5 e 3,5, os leitos de esferocilindros passam a ter maiores frações de vazios que os de esferas. Retornando-se às imagens da Figura 4.2.1, percebe-se esta distinção na compactação dos leitos a partir da diferença nas alturas atingidas por cada um (sabendo-se que, nos três casos, o volume total de sólidos é o mesmo). Os graus de liberdade adicionais que têm os esferocilindros em relação a esferas, devido à sua assimetria, possibilitam uma ocupação mais eficiente de certas lacunas irregulares que se formam no interior de um leito, o que promove uma maior compactação do mesmo. Por outro lado, por se tratar de partículas rígidas, efeitos



estéricos se tornam importantes com o aumento da razão de alongamento, o que amplia os volumes dos interstícios e, por conseguinte, aumenta a fração de vazios do leito. Possivelmente, a combinação entre os dois efeitos citados é responsável pelo comportamento observado através da Figura 4.2.3. Experimentalmente, Zou e Yu (1996) observaram comportamento similar em leitos monodispersos de discos e cilindros. No caso de esferocilindros, não foram localizados dados experimentais, mas um trabalho recente de Williams e Philipse (2003), usando um outro método computacional, corrobora os resultados aqui encontrados (no referido trabalho, o valor de  $\varphi = 0,5$  não foi considerado, mas se previu um mínimo na fração de vazios para leitos de esferocilindros com  $\varphi = 0,4$ ).

Sabe-se que as características de um leito dependem das condições envolvidas na sua compactação. No caso de leitos de esferas de mesmo tamanho aleatoriamente distribuídas, segundo Reyes e Iglesia (1991), frações de vazios experimentalmente medidas variam de 0,36 (para o tipo de compactação denominado *random-close packing*) a 0,42 (para o *random-loose packing*). Um valor próximo a este último consta na Tabela 4.2.2 para leitos periódicos de esferas ( $\varphi = 0$ ) obtidos após vibrações com amplitude igual a  $0,5 \times 10^{-3}$  m. Este fato sugere que a curva inferior da Figura 4.2.3(a) é a que mais provavelmente representa leitos reais de esferocilindros. De qualquer modo, a fração de vazios média calculada para esferocilindros com  $\varphi = 0,5$  ( $\bar{\varepsilon}_L = 0,3463$ ) é menor que o valor típico alcançado por esferas em compactações do tipo *random-loose*, indicando que uma autêntica redução na fração de vazios pode ser obtida usando-se este tipo de esferocilindro em lugar de esferas. Uma possível aplicação prática para este resultado reside no armazenamento de gás natural veicular (GNV). Como afirmado por Wegrzyn and Gurevich (1996), um dos problemas em se utilizar sólidos granulares para armazenar gás natural por adsorção é a baixa eficiência volumétrica (volume de gás nas condições normais de temperatura e pressão dividido pelo volume do tanque) deste tipo de processo, quando comparado ao armazenamento por compressão. De acordo com os autores, melhorias na densidade de compactação dos leitos de sólidos adsorventes seriam uma possível solução.

#### 4.2.2 – Número de Coordenação

Como já foi mencionado, o número médio de contatos que cada partícula de um leito realiza com aquelas que a circundam, chamado de número de coordenação, é um fator que exerce grande influência sobre fenômenos que envolvem condução através do meio sólido, tal como o transporte de energia térmica ou de carga elétrica. Portanto, mostra-se interessante o estudo da variação desta propriedade nos leitos de partículas esferocilíndricas obtidos neste trabalho.

Os números de coordenação dos sistemas contidos em caixas com condições de contorno periódicas são calculados segundo o procedimento apresentado no capítulo anterior (Seção 3.5.3). Baseando-se nos argumentos expostos na subseção anterior, realiza-se a amostragem em uma porção central com 60% da altura de um leito ( $v_L = 0,6$ ). Não se consideram, neste estudo, os leitos formados em caixas cilíndricas. Outro parâmetro cujo valor deve ser fixado é a tolerância ( $\xi$ ) empregada na detecção dos contatos, tal como foi definida na Seção 3.5.3. A Figura 4.2.5 mostra o efeito deste parâmetro sobre o cálculo do número de coordenação de alguns dos leitos simulados.

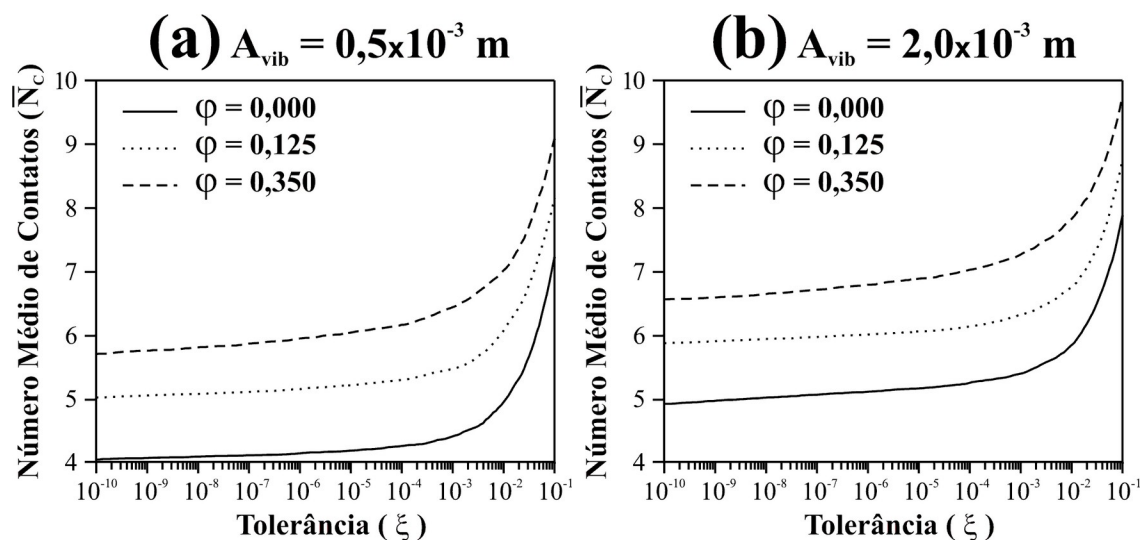


Figura 4.2.5 – Influência da tolerância  $\xi$  sobre o cálculo do número médio de contatos por partícula (número de coordenação).

Como se observa na Figura 4.2.5, há apenas um pequeno aumento no número de coordenação calculado para os sistemas quando  $\xi$  varia entre  $10^{-10}$  e  $10^{-4}$ . Isto mostra que o número de ciclos da etapa de compactação das simulações de Monte Carlo foi suficiente para se obter uma aproximação adequada entre as partículas. Quando o valor da tolerância ultrapassa a faixa mencionada, acentua-se o aumento do número de coordenação calculado. Assim, elege-se  $10^{-5}$  como um valor adequado para  $\delta$ . Então, empregando-se  $v_L = 0,6$  e  $\xi = 10^{-5}$ , calculam-se a média e o desvio padrão do número de coordenação de cada conjunto de 10 simulações de sistemas com condições de contorno periódicas nas laterais. Os resultados encontram-se na Tabela 4.2.3.

Tabela 4.2.3 – Número médio de contatos por partícula nos leitos simulados.

| $\varphi$ | Número de Coordenação                    |               |  |               |
|-----------|--|---------------|--|---------------|
|           | $A_{vib} = 0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               | $A_{vib} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$ |               |
|           | Média                                    | Desvio Padrão | Média                                    | Desvio Padrão |
| 0,000     | 4,220                                    | 0,027         | 4,204                                    | 0,038         |
| 0,125     | 5,243                                    | 0,044         | 5,118                                    | 0,031         |
| 0,250     | 5,589                                    | 0,063         | 5,527                                    | 0,024         |
| 0,500     | 5,904                                    | 0,041         | 5,848                                    | 0,050         |
| 0,750     | 6,011                                    | 0,046         | 5,979                                    | 0,053         |
| 1,000     | 6,084                                    | 0,037         | 6,045                                    | 0,022         |
| 1,500     | 6,114                                    | 0,027         | 6,058                                    | 0,058         |
| 2,500     | 6,072                                    | 0,063         | 6,005                                    | 0,052         |
| 3,500     | 5,995                                    | 0,038         | 5,946                                    | 0,051         |

Utilizam-se os valores numéricos da Tabela 4.2.3 para a confecção das duas curvas dispostas na Figura 4.2.6. Como se nota, os números de coordenação dos leitos formados com a menor amplitude de vibração são superiores aos dos seus correlatos obtidos com a amplitude maior. Tal diferença, embora muito pequena, é sistemática. Isto é coerente com os resultados de fração global de vazios, já que a menor amplitude é responsável por leitos mais compactos. Observa-se, também, que o valor do número de coordenação sofre um aumento abrupto na região de baixas razões de alongamento, e praticamente se estabiliza para partículas mais alongadas. Ocorre uma pequena queda no final de cada curva da Figura 4.2.6, o que poderia indicar a existência de um ponto máximo. Porém, esta tendência não pode ser confirmada, pois a redução observada

encontra-se dentro da faixa de precisão dos cálculos, o que pode ser constatado através dos valores de desvio padrão mostrados na Tabela 4.2.3.

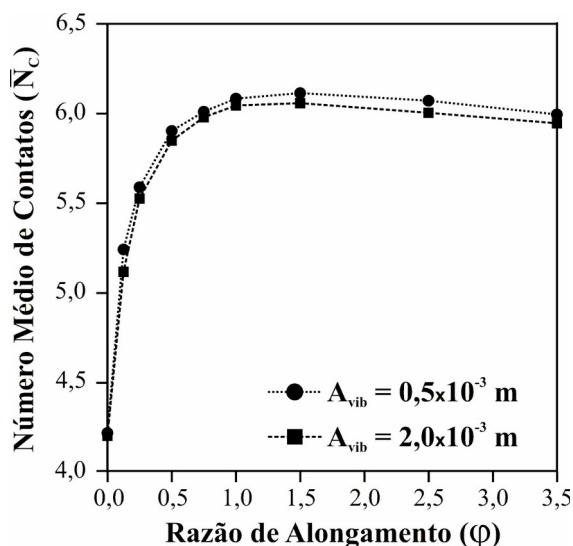


Figura 4.2.6 – Número médio de contatos por partícula esferocilíndrica em leitos monodispersos simulados.

Ao se cruzarem os resultados de número de contatos (Tabela 4.2.3) com aqueles obtidos para a fração global de vazios dos leitos simulados (Tabela 4.2.2), conclui-se que sistemas com a mesma fração de vazios podem apresentar diferentes números de coordenação. Isto pode ser um fator importante na escolha do formato das partículas que constituirão um leito para uso em alguma aplicação específica, caso certos fenômenos de condução na fase sólida sejam relevantes. Por fim, afirma-se que, não obstante a importância do número de coordenação, deve-se ter em mente que a configuração da malha de contatos que se forma no leito é crucial quando se trata de um meio condutor heterogêneo, tal como seriam os leitos aqui obtidos.

#### 4.2.3 – Perfis de Frações Locais de Vazios

Os perfis de frações locais de vazios de um leito de partículas são descrições condensadas, porém de apreciação e interpretação simplificadas, sobre a malha de interstícios de uma dada configuração. Como foi exposto no capítulo anterior (Seção 3.5.2), para se obter tais perfis em um leito cilíndrico, deve-se saber calcular a soma dos

comprimentos das cordas de qualquer circunferência  $(z, r)$ , do sistema de coordenadas cilíndricas, que são intersectadas por partículas. Um procedimento robusto para tal cálculo, desenvolvido neste trabalho, está descrito no Apêndice A. Para a avaliação dos perfis, define-se uma malha regular de 201 x 121 coordenadas ao longo das direções  $Z$  e  $r$ , respectivamente, distribuídas sobre toda a extensão de um leito. Os motivos desta escolha serão esclarecidos adiante.

Para que seja possível o cálculo do perfil cilíndrico médio do conjunto de leitos obtidos através das 10 realizações de um determinado sistema, deve-se ter o cuidado de escolher as mesmas coordenadas  $(z, r)$  para todos eles. No caso da direção  $r$ , pelo fato de todas as caixas terem o mesmo diâmetro  $(D)$ , basta utilizar a seguinte lei de formação para se obter as 120 posições da malha regular:

$$r_n = \frac{n}{120} \frac{D}{2}, \quad n = 0, \dots, 120. \quad (4.2.1)$$

Desta forma, similarmente ao exemplo da Figura 3.5.1(b), cada caixa com  $12 \times 10^{-3} \text{ m}$  de diâmetro é dividida em 120 regiões anulares com espessura de  $0,05 \times 10^{-3} \text{ m}$ , cada uma. Os comprimentos de interseção são, então, calculados em circunferências coaxiais distribuídas ao longo das fronteiras entre tais regiões.

No caso da direção  $Z$ , a padronização das posições da malha para os 10 leitos de um mesmo sistema é mais intrincada, porque cada leito, após a aplicação do Método de Monte Carlo, adquire uma altura própria  $(H_L)$ , definida segundo a Equação (3.5.5). A solução para isto consiste em se tomar a menor entre estas alturas como padrão. Então, representando-se tal altura por  $H_L^{\{\min\}}$ , obtêm-se as altitudes utilizadas para a construção da malha para cálculo dos perfis de frações locais de vazios de cada sistema a partir da seguinte lei de formação:

$$z_n = -\frac{H}{2} + \frac{n}{200} H_L^{\{\min\}}, \quad n = 0, \dots, 200. \quad (4.2.2)$$

Assim, cada caixa é dividida em 200 camadas cilíndricas de mesma altura, como na Figura 3.5.1(a). Após o cômputo dos comprimentos de interseção entre as partículas e todas as circunferências da malha gerada (Cf. Apêndice A), parte-se para o cálculo dos seus perfis cilíndrico, axial e radial de fração de vazios. O primeiro deles é obtido a partir da Equação (3.5.11). Os demais são obtidos através de integrações numéricas, efetuadas por meio do Método de Simpson (Press *et al.*, 1992, p. 124).

Obtém-se o perfil axial de fração de vazios de um leito, de acordo com as Equações (3.5.13) a (3.5.15), a partir da integração dos 121 comprimentos de interseção computados em cada posição  $z_n$  da malha gerada. Distintamente, no caso do perfil radial, que é dado pelas Equações (3.5.16) a (3.5.18), não se consideram, no momento da integração, todos os 201 valores calculados nas posições  $r_n$  da malha. Com o propósito de se evitar a contabilização de efeitos de borda, descartam-se 40 valores na região de topo e 40 valores na região de fundo. Desta forma, restam apenas os 121 valores centrais de  $p(z, r)$ , o que corresponde a se tomar uma fração de amostragem ( $v_L$ ) igual a 0,6. As altitudes  $z_{\min}$  e  $z_{\max}$ , que são os limites de integração na Equação (3.5.16), equivalem às altitudes  $z_{40}$  e  $z_{160}$  da malha.

Para a representação gráfica dos perfis de frações locais de vazios de um leito cilíndrico, substituem-se as coordenadas  $(z, r)$  por coordenadas  $(z', r')$ , onde  $z'$  é a distância à parede de fundo ( $z' = z + H/2$ ) e  $r'$  é a distância à parede cilíndrica lateral ( $r' = D/2 - r$ ). A partir dos perfis de cada um dos 10 leitos de um determinado sistema, calculam-se os perfis médios do mesmo através de médias aritméticas. Para ilustrar este procedimento, mostram-se na Figura 4.2.7 os perfis axiais e radiais de frações de vazios nas direções axial e radial de todos os leitos de esferas obtidos com vibrações de amplitude igual a  $2,0 \times 10^{-3}$  m (linhas pontilhadas), juntamente com o seus perfis médios (linhas sólidas).

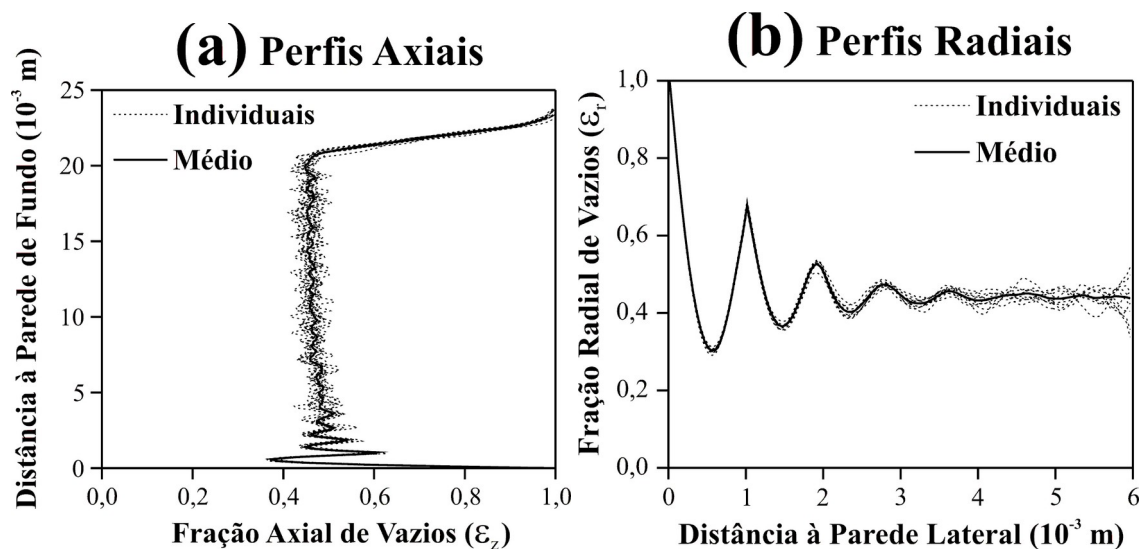


Figura 4.2.7 – Perfis individuais e médios de frações de vazios nas direções axial e radial ( $\varphi = 0$  e  $A_{vib} = 2,0 \times 10^{-3}$  m).

No gráfico da Figura 4.2.7(a), que apresenta os perfis axiais, vê-se que a fração de vazios sofre uma oscilação sistemática nas regiões de fundo dos leitos, cuja amplitude decai até uma distância de aproximadamente 4 mm da parede, onde dá lugar a uma oscilação aleatória. Comportamento semelhante é observado no caso dos perfis radiais, mostrados na Figura 4.2.7(b), em relação à parede lateral.

O ruído observado nos perfis axiais individuais também aparece, embora mais suavemente, no perfil médio. No entanto, acredita-se que este tenderia a se tornar constante, a partir de determinada altitude, se a amostragem fosse mais ampla, isto é, se houvesse mais leitos simulados ou, alternativamente, se o diâmetro das caixas de simulação fosse maior, já que os resultados advêm de integrações na direção radial. O perfil radial médio, provavelmente por conta do maior espaço disponível para integrações na direção axial, aproxima-se mais deste comportamento constante nas regiões remotas à parede.

Conclui-se, a partir da Figura 4.2.7(a), que a região correspondente à fração de amostragem de com 60% da altura total do leito se encontra fora das zonas de influência da parede de fundo e da região de topo, mostrando que tal fração é suficiente para eliminar tal influência sobre uma propriedade calculada.

Pode-se fazer uma comparação entre os perfis radiais médios de fração de vazios dos diferentes sistemas simulados. Na Figura 4.2.8, apresentam-se três destes perfis. Os sistemas escolhidos para a comparação são aquele composto por esferas ( $\varphi = 0,0$ ), o que apresenta a menor fração global de vazios ( $\varphi = 0,5$ ) e aquele constituído pelas partículas mais alongadas ( $\varphi = 3,5$ ). As Figuras 4.2.8(a) e 4.2.8(b) se referem aos leitos obtidos com  $A_{\text{vib}} = 0,5 \times 10^{-3} \text{ m}$  e com  $A_{\text{vib}} = 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$ , respectivamente. De um modo geral, as curvas correlatas destas duas figuras são bastante assemelhadas. Parece, contudo, que as oscilações para o caso da menor amplitude de vibração [Figura 4.2.8(a)] tendem a ser um pouco mais acentuadas, principalmente para leitos de esferas. Como tal amplitude é responsável pela obtenção dos leitos mais compactos, presume-se que isto resulte de uma maior ordenação das partículas, que se reflete nas referidas oscilações.

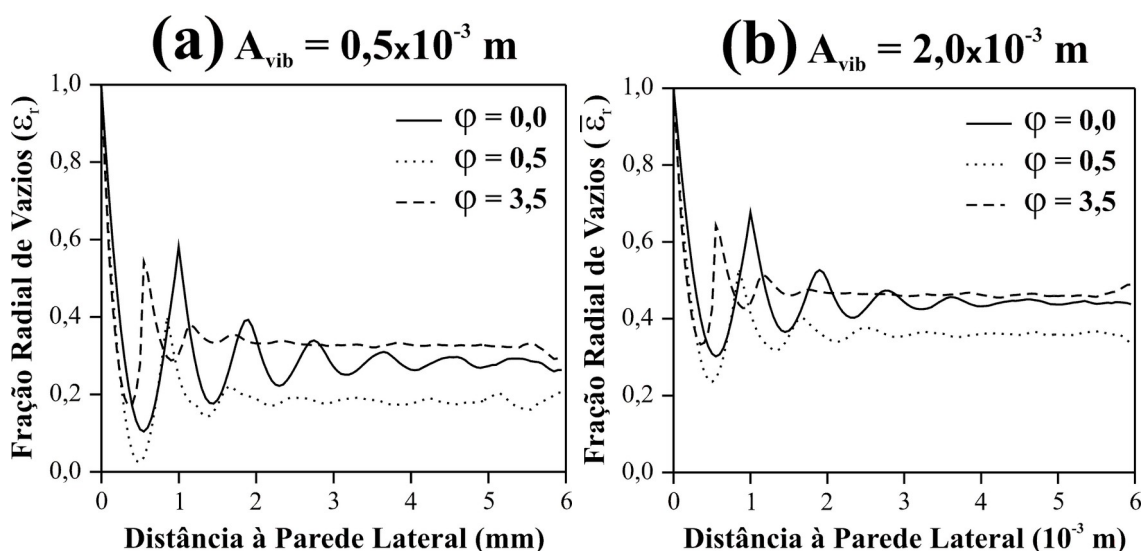


Figura 4.2.8 – Comparação entre os perfis radiais médios de fração de vazios de diferentes sistemas.

Devido à semelhança entre os perfis das Figuras 4.2.8(a) e 4.2.8(b), as discussões adiante são independentes da amplitude de vibração empregada. No caso dos leitos de esferas, observa-se que as oscilações permanecem até a região próxima ao eixo longitudinal da caixa. Este fenômeno foi observado em trabalhos anteriores, tanto experimentais quanto computacionais. Vários autores relatam que tal oscilação ocorre até uma distância da parede em torno de 4 a 5 vezes o diâmetro das partículas. Segundo



Govindarao e Froment (1986), esta oscilação bem definida ocorre por causa do confinamento provocado por uma parede que, por ser rígida e geometricamente regular, obriga que haja uma forte ordenação estrutural da primeira camada de partículas que sobre ela se apóiam. Uma segunda camada se forma, então, sobre a primeira, apresentando um grau menor de ordenação. Camadas subseqüentes se formam, cada vez menos ordenadas, até que uma distribuição completamente aleatória surja nas regiões mais afastadas da parede.

De acordo com a Figura 4.2.8, os sistemas formados por esferocilindros também apresentam perfis radiais de frações de vazios com comportamento oscilatório nas proximidades da parede lateral. Contudo, o amortecimento, nestes casos, é mais proeminente que aquele observado para as esferas. No caso em que  $\varphi = 0,5$ , as oscilações praticamente desaparecem a aproximadamente  $3 \times 10^{-3}$  m de distância da parede. Já no caso de  $\varphi = 3,5$ , tal distância cai para um valor em torno de  $2 \times 10^{-3}$  m. Isto mostra que a ordenação imposta pela parede lateral exhibe uma menor propagação para partículas mais alongadas.

O primeiro pico observado em cada uma das curvas da Figura 4.2.8 é notavelmente mais abrupto que os demais. Tal pico representa o final da primeira camada de partículas formada sobre a parede lateral. No caso de leitos de esferas, em que as partículas que tocam a parede não podem assumir diferentes orientações, o primeiro pico do perfil radial de vazios ocorre, necessariamente, na distância  $r' = \sigma$ , fato que já foi experimentalmente verificado por diversos autores (Benenati e Brosilow, 1962; Ridgway e Tarbuck, 1966; Thadani e Peebles, 1966; Pillai, 1977; Goodling *et al.*, 1983). Por outro lado, no caso de leitos de esferocilindros, a posição do primeiro pico depende de como as partículas da primeira camada se orientam. Na Figura 4.2.8, observa-se que o primeiro pico, independentemente da razão de alongamento, localiza-se próximo à distância equivalente ao diâmetro das partículas (vide Tabela 4.2.1), o que demonstra que elas tendem a se orientar de forma a se alinharem à parede lateral da caixa, fato que pode ser observado através das imagens da Figura 4.2.1.

Os resultados apresentados nesta seção mostram que os graus de liberdade adicionais que as partículas esferocilíndricas possuem em relação às esferas, além de poder proporcionar melhor compactação aos leitos e de aumentar o número de contatos entre as partículas, também servem para dissipar mais eficientemente a influência exercida pelas paredes de um recipiente sobre a distribuição espacial das partículas.

### 4.3 – Misturas Binárias

Com o intuito de se verificar o efeito do formato das partículas sobre a segregação de misturas binárias de esferocilindros, utiliza-se o método de Monte Carlo com duas espécies de partículas de igual volume e densidade (cujos valores são os mesmos adotados na seção anterior), mas com diferentes razões de alongamento. Os dois componentes de uma mistura são denominadas de Espécie “A” e Espécie “B”, cada um sendo composto por um certo número de partículas ( $N_p^{\{A\}}$  ou  $N_p^{\{B\}}$ ) com uma razão de alongamento específica ( $\varphi^{\{A\}}$  ou  $\varphi^{\{B\}}$ ). Partindo-se de uma configuração inicial já compactada, simulam-se diversos ciclos de vibração com amplitude constante igual a  $2,0 \times 10^{-3}$  m e com os seguintes parâmetros:  $N_{\min} = 10^3$ ,  $N_{\text{med}} = 10$  e  $\delta_E = 10^{-4}$ . Visando-se obter uma configuração final mecanicamente estável, a elevação das partículas é suprimida do último ciclo de vibração. Assim como na seção anterior, a temperatura granular ( $T$ ) é nula, a densidade do fluido ( $\rho_f$ ) é  $1,0 \text{ kg/m}^3$  e a aceleração da gravidade ( $g$ ) é  $9,8 \text{ m/s}^2$ .

Para a geração das configurações iniciais, a primeira alternativa seria utilizar um método similar ao descrito na seção anterior e, então, executar um certo número de ciclos de Monte Carlo na presença do campo gravitacional, de forma a compactar o leito de partículas. Observa-se, entretanto, que uma pequena segregação ocorre durante o assentamento. Para se identificar a segregação exclusivamente produzida por vibrações, é importante iniciar uma simulação a partir de uma configuração compactada na qual as espécies estejam completamente misturadas. Portanto, necessita-se de um novo método. A solução adotada aqui é assentar as partículas individualmente, o que é feito inserindo-se cada partícula “i” em uma posição aleatoriamente escolhida acima do leito já formado (ou acima da parede de fundo, caso ela seja a primeira partícula) e, então,

executando-se, na presença da gravidade, vários passos de Monte Carlo somente com tal partícula, mantendo-se as outras imóveis. Durante estes passos, os valores de  $\Delta r_{\max,i}$  e  $\Delta \theta_{\max,i}$  são mantidos pequenos e constantes (5% do raio da partícula e  $\pi/180$  radianos, respectivamente). Se o deslocamento e a rotação forem ambos rejeitados em 200 passos consecutivos, mostrando que a partícula “i” deve estar próxima de uma posição mecanicamente estável, cessa-se o procedimento e insere-se uma nova partícula. É importante notar que se pode produzir, por meio deste método, tanto configurações misturadas quanto segregadas, dependendo-se da ordem pela qual as partículas das espécies “A” e “B” são introduzidas no sistema.

Necessita-se, também, identificar a evolução da segregação das espécies ao longo da direção vertical. Uma maneira simples é calcular a diferença entre as altitudes médias das duas espécies ao final de cada ciclo de vibração (imediatamente antes da elevação das partículas). A altitude média de uma espécie “ $\alpha$ ”,  $z^{\{\alpha\}}$ , corresponde à média aritmética das componentes z dos vetores  $\mathbf{r}_i$  de todas as suas partículas. Então,

$$z^{\{\alpha\}} = \frac{\sum_{i=1}^{N_p} \Omega_{\alpha i} r_{iz}}{N_p^{\{\alpha\}}}, \quad (4.3.1)$$









onde  $N_p^{\{\alpha\}}$  é o número de partículas da espécie “ $\alpha$ ” e  $\Omega_{\alpha i}$  é um parâmetro de seleção, definido por

$$\Omega_{\alpha i} = \begin{cases} 1 & \text{se a partícula “i” pertence à espécie “\alpha”} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}. \quad (4.3.2)$$

Em uma mistura de duas espécies “A” e “B”, a diferença  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  é próxima de zero para uma configuração misturada e possui um valor máximo ou mínimo para um estado completamente segregado. Tal diferença é positiva e aumenta durante o processo de vibração se a Espécie “B” tende a se concentrar no topo. Em contrapartida, se for a Espécie “A” a migrar para o topo, a diferença é negativa e se reduz durante o processo.

Na Tabela 4.3.1, apresentam-se os formatos das partículas constituintes de quatro misturas simuladas. Em todos os casos, a Espécie “A” é o componente com a menor razão de alongamento. Para cada simulação, cria-se uma configuração inicial misturada com 2000 partículas, sendo 1000 de cada espécie, em uma caixa com condições de contorno periódicas nas laterais ( $L = 10 \times 10^{-3} \text{ m}$ ). Então, efetuam-se 1500 ciclos de vibração. A Figura 4.3.1 contém resultados de  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$ , calculados ao longo das simulações, que demonstram a ocorrência de segregação em todas as misturas. Em tal figura e nas subseqüentes, cada curva corresponde a uma única simulação. Nas misturas (I) e (II), compostas de esferas e esferocilindros curtos, aquelas ascendem e se concentram no topo, enquanto estes realizam o movimento oposto. Entretanto, uma inversão em tal comportamento ocorre quando os esferocilindros são mais longos, como se observa na Figura 4.3.1 para a Mistura (III). Tal inversão pode ser visualizada com o auxílio da Figura 4.3.2, que representa as últimas configurações obtidas nas simulações das Misturas (I) e (III). Tal figura também mostra que, após 1500 ciclos de vibração, a Mistura (I) apresenta um grau de mistura menor, ou seja, uma segregação mais completa que a da Mistura (III).

Tabela 4.3.1 – Misturas binárias para estudo de segregação.

| Mistura | Espécie “A”   | Espécie “B”   | $\varphi^{\{A\}}$ | $\varphi^{\{B\}}$ |
|---------|---|---|-------------------|-------------------|
| (I)     |  |  | 0                 | 0,5               |
| (II)    |  |  | 0                 | 1,5               |
| (III)   |  |  | 0                 | 3,5               |
| (IV)    |  |  | 0,5               | 1,5               |

Nota: As dimensões das partículas podem ser encontradas na Tabela 4.2.1

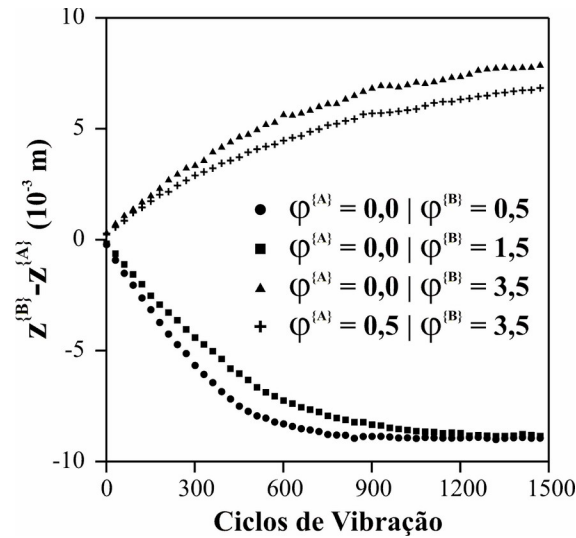


Figura 4.3.1 – Evolução da segregação de misturas binárias de esferocilindros com igual volume e densidade, mas diferentes razões de alongamento.

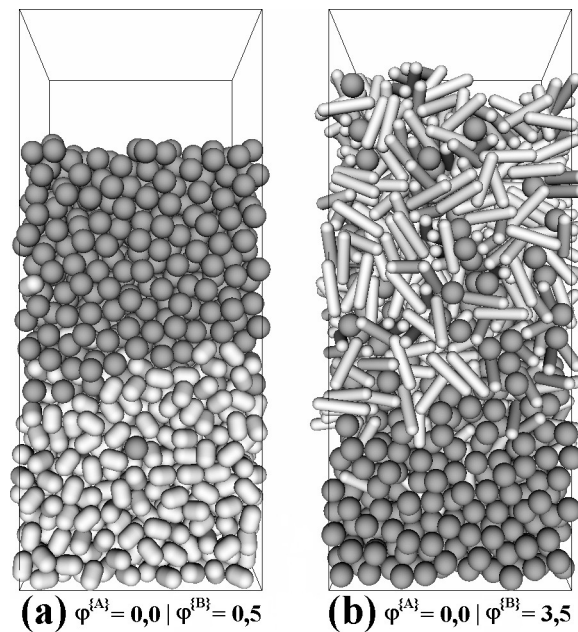


Figura 4.3.2 – Imagens tridimensionais das misturas (I) e (III) (Tabela 4.3.1) após 1500 ciclos de vibração (sistemas com condições de contorno periódicas nas laterais).

Para se tentar explicar estes resultados, lança-se mão daqueles para leitos monodispersos, mostrados na Figura 4.2.3. Em qualquer das curvas desta figura, os esferocilindros com  $\varphi=0,5$  ou com  $\varphi=1,5$  [Espécies “B” das misturas (I) e (III), respectivamente] produzem leitos com menores porosidades que as daqueles compostos por esferas ( $\varphi=0$ ), enquanto esferocilindros com  $\varphi=3,5$  [Espécie “B” da Mistura

(III)] produz leitos com porosidades maiores. Portanto, supondo-se que uma mistura binária sujeita a vibrações mecânicas evolui para um estado completamente segregado, observa-se que dois leitos monodispersos são formados de tal maneira que o mais denso se situa no fundo do recipiente. Em outras palavras, a mistura se comporta como um sistema de fluidos imiscíveis expostos ao campo gravitacional, que evolui de forma a alcançar o menor nível possível de energia potencial. Este resultado é corroborado no caso de um mistura binária de esferocilindros, tal como a Mistura (IV) da Tabela 4.3.1. A Figura 4.3.1 mostra que as partículas com  $\varphi = 0,5$ , que promovem os leitos monodispersos de menor fração global de vazios, se concentram no fundo do recipiente. Então, pode-se inferir que diferenças na forma geométrica das partículas promovem segregação em misturas binárias sob vibração por meio da sua influência na densidade de compactação de sistemas monodispersos.

De acordo com a Figura 4.2.3, esferocilindros com um certo valor de razão de alongamento entre 2,5 e 3,5 produzem leitos monodispersos com porosidades idênticas às de leitos de esferas. Uma interpolação com os resultados da Figura 4.2.3(b) mostra que tal valor deve ser em torno de 2,66. A força motriz para segregação, exposta no último parágrafo, não existe em uma mistura entre tais esferocilindros e esferas. Um outro fator será responsável pela segregação, portanto, se ela ocorrer em tal sistema. Para se verificar esta possibilidade, simulam-se misturas de 1000 esferas e 1000 esferocilindros com  $\varphi = 2,66$ . De modo a evitar efeitos de diferenças de tamanho, todas as partículas possuem o mesmo volume daquelas que constam na Tabela 4.2.1. Ademais, todos os outros parâmetros são idênticos aos utilizados nos estudos prévios. Realizam-se três simulações longas, com 5000 ciclos de vibração. A primeira delas parte de um estado inicial totalmente misturado, enquanto as outras começam com configurações segregadas, alternando-se as posições dos componentes (topo e fundo). A Figura 4.3.3 contém valores de  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  calculados ao longo das simulações. Pode-se observar que os três sistemas simulados evoluem para estados completamente misturados, corroborando a assertiva de que a única força motriz para segregação presente nas misturas estudadas até aqui é a diferença nas densidades de compactação dos componentes como sistemas monodispersos.

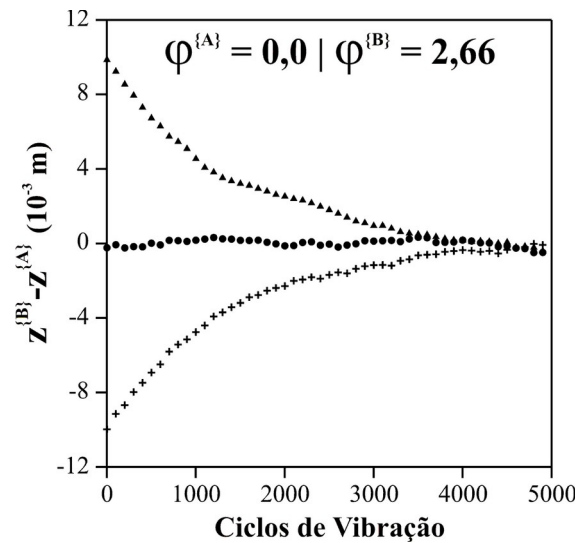


Figura 4.3.3 – Evolução da segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com  $\varphi = 2,66$  de mesmo volume.

Negligenciando-se efeitos de parede, pode-se afirmar que a fração de vazios de um leito monodisperso constituído por esferas rígidas é independente do tamanho destas. Conseqüentemente, em uma mistura binária de esferas com diâmetros distintos e igual densidade, não há diferença, com respeito ao nível de energia potencial alcançado pelo sistema, se as maiores se concentram no fundo ou no topo do leito. Entretanto, sabe-se que tais partículas tendem a migrar para o topo quando o sistema é submetido a vibrações (Efeito Castanha-do-Pará). Mais ainda, se as partículas maiores forem também as mais densas, é energeticamente favorável que elas fiquem no fundo do leito. Todavia, simulações de Monte Carlo mostram que elas, ainda assim, concentram-se no topo (Castier *et al.*, 1998). Isto confirma que o efeito de diferenças nas densidades das partículas é muito menos importante, na promoção de segregação, que o efeito de diferenças de tamanho (Rosato *et al.*, 2002). Neste caso, a analogia com fluidos imiscíveis torna-se inapropriada.

No presente trabalho, é possível contrastar os efeitos de tamanho e forma geométrica. Primeiramente, consideram-se misturas de esferas (Espécie “A”, com volume  $v^{(A)}$ ) e esferocilindros com  $\varphi = 0,5$  (Espécie “B”, com volume  $v^{(B)}$ ), ambos com a mesma densidade. Como a fração de vazios de um leito monodisperso não depende, em princípio, do volume das partículas, o mais baixo nível de energia

potencial será alcançado se tais esferocilindros se concentrarem no fundo do recipiente, independentemente da razão  $v^{\{B\}}/v^{\{A\}}$ . No entanto, se os esferocilindros possuírem maior volume que as esferas, pode ocorrer que o efeito de tamanho predomine e, então, eles se movam para cima, como ocorre em uma mistura de esferas. De forma a se averiguar tal possibilidade, executam-se três novas simulações fixando-se o diâmetro das esferas em  $1 \times 10^{-3}$  m e variando-se o volume dos esferocilindros de tal modo que a razão  $v^{\{B\}}/v^{\{A\}}$  seja igual a 1,1, 1,2 e 1,5, respectivamente. Todas as partículas têm densidade igual a  $1 \times 10^3$  kg/m<sup>3</sup>. O número total de partículas é 2000 e a quantidade de cada espécie é estabelecida de tal modo que as duas possuam aproximadamente o mesmo volume, ou seja,  $N_p^{\{B\}}v^{\{B\}} \approx N_p^{\{A\}}v^{\{A\}}$ . As simulações são executadas nas mesmas condições apresentadas no início desta seção, sendo que todas elas se iniciam com configurações misturadas. Perfis de  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  versus ciclo de vibração obtidos em tais simulações são mostrados na Figura 4.3.4, na qual parte dos resultados para  $v^{\{B\}}/v^{\{A\}} = 1$ , oriundos do estudo anterior, é repetida para facilitar a comparação. Vê-se que o efeito da forma geométrica ainda predomina quando os esferocilindros são apenas 10% maiores, em volume, que as esferas, mas o efeito de tamanho prevalece quando esta diferença sobre para 50%. Para  $v^{\{B\}}/v^{\{A\}} = 1,2$ , parece haver um balanço entre os dois efeitos, já que não se observa nenhuma segregação após 1000 ciclos de vibração.

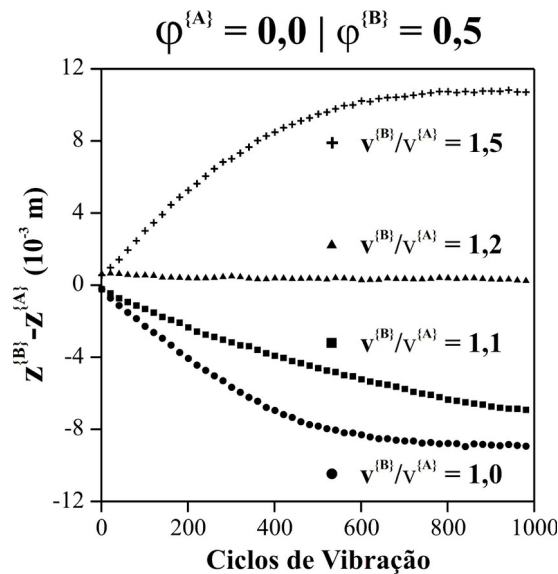


Figura 4.3.4 – Comparação entre o efeitos de forma e tamanho sobre a segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com  $\phi = 0,5$ .



Efetua-se um estudo análogo para misturas de esferas (Espécie “A”) e esferocilindros com  $\varphi = 3,5$  (Espécie “B”). Neste caso, as esferas são as partículas que produzem os leitos monodispersos mais densos. Torna-se interessante, então, simular sistemas nos quais as esferas possuam maiores volumes que os esferocilindros. Assim sendo, simulam-se três misturas com razões  $v^{\{A\}} / v^{\{B\}}$  (o inverso do caso anterior) iguais a 1,1, 1,2 e 1,5. Os resultados obtidos ao longo destas simulações para  $z^{\{B\}} - z^{\{A\}}$  estão ilustrados na Figura 4.3.5, juntamente com parte dos resultados prévios para  $v^{\{A\}} / v^{\{B\}} = 1$ . Desta vez, a predominância do efeito de tamanho claramente surge quando as esferas são 20% ou 50% maior, em volume, que os esferocilindros. Por sua vez, no caso em que a diferença em volumes é de 10%, nota-se uma leve tendência de inversão, quando comparado ao caso de volumes iguais, indicando que o balanço entre os efeitos deve ocorrer para uma diferença um pouco menor que os 10%. Esta inversão mais precoce, quando comparada à observada do caso das misturas entre esferas e esferocilindros mais curtos, é coerente com os resultados da Figura 4.2.3, porque ela mostra que a intensidade do efeito de forma depende diretamente da diferença entre as frações de sólido dos leitos monodispersos formatos pelos componentes de uma mistura.

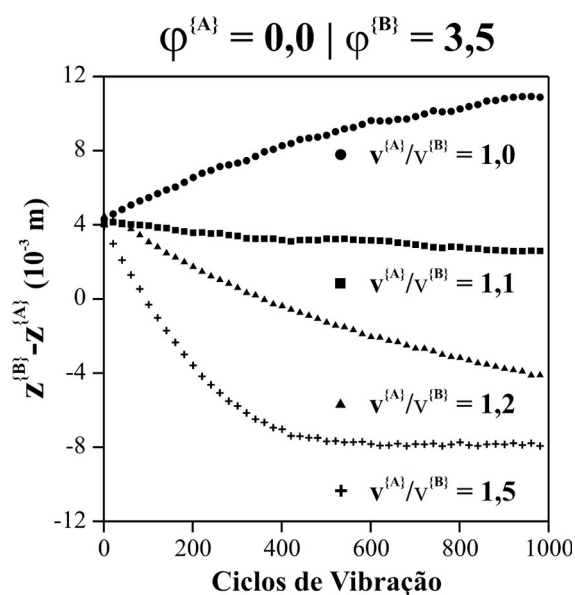


Figura 4.3.5 – Comparação entre o efeitos de forma e tamanho sobre a segregação de misturas binárias de esferas e esferocilindros com  $\varphi = 3,5$ .

A Figura 4.3.6 mostra as configurações finais das simulações realizadas com as maiores diferenças de volume entre esferas e esferocilindros. A Figura 4.3.6(a) se refere ao caso em que os esferocilindros têm razão de alongamento igual a 0,5, enquanto a Figura 4.3.6(b) faz referência àquele em que tal razão é igual a 3,5. Comparando-se tais imagens com as da Figura 4.3.2, notam-se as inversões nos comportamentos dos sistemas devidas à predominância do efeito de diferenças de tamanho sobre o fenômeno da segregação.

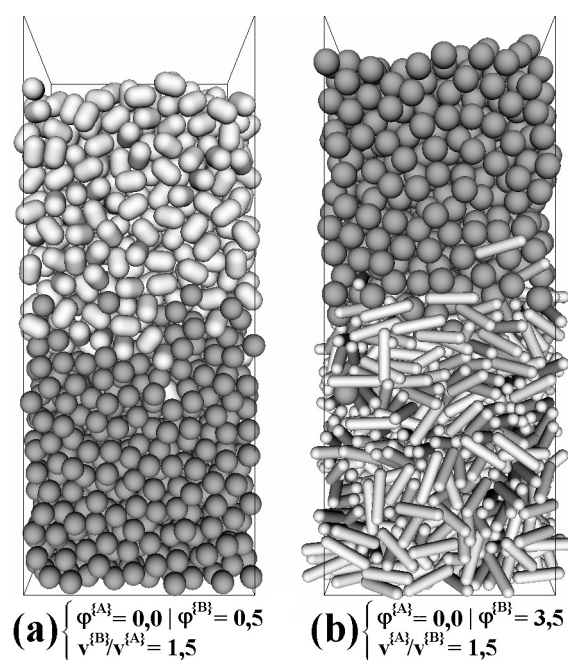


Figura 4.3.6 – Imagens tridimensionais de misturas binárias entre esferas e esferocilindros de volumes distintos, após 1000 ciclos de vibração.

Na seção precedente, concluiu-se que a densidade de compactação de um leito monodisperso de esferocilindros depende da eficiência com a qual as partículas preenchem lacunas que aparecem no leito durante o assentamento. Considerando-se vibrações mecânicas como seqüências de assentamentos, os resultados da presente seção levam à conclusão de que, em misturas binárias de esferocilindros sujeitas a vibrações, o componente que se concentra no fundo do recipiente é sempre aquele cujas partículas possuem a maior habilidade de preencher as referidas lacunas. Tendo-se em vista que tal habilidade é uma combinação de efeitos de tamanho e forma das partículas,

esta explicação corresponde a um desdobramento do mecanismo proposto por Rosato e colaboradores (1986) para a segregação por diferenças de tamanho.

Finalmente, vale ressaltar que, devido à inexistência de dados, não há sustentação experimental para os resultados obtidos neste trabalho. Contudo, eles correspondem a previsões realizadas a partir de uma metodologia que, em trabalhos anteriores, foi capaz de representar bem o comportamento experimental de sistemas constituídos por esferas.